Basissatzentwicklung und Diagonalisation

Störungstheorie → Näherungslösung

numerische exakte Lösung
→ numerisches Verfahren, das im Grenzfall gegen die exakte analytische Lösung konvergiert

Basissatzentwicklung

Beispiel: Entwicklung in harmonischen Oszillator - Eigenfunktionen

$$|\psi\rangle = \sum_{n=0}^{N} c_n \, |n\rangle$$

Im Grenzfall $N \to \infty$ kann jede Wellenfunktion exakt durch diese Entwicklung dargestellt werden, da die $|n\rangle$ eine vollständige Basis bilden.

Bestmögliche Näherungslösung für gegebenes N

→ Variationsprinzip

$$|\tilde{\Psi}_N\rangle = \sum_{n=0}^{N} c_n^{(N)} |n\rangle \qquad \text{(Ansatz)}$$

Variationsprinzip:

$$\frac{\langle\tilde{\Psi}_N|\hat{H}|\tilde{\Psi}_N\rangle}{\langle\tilde{\Psi}_N|\tilde{\Psi}_N\rangle} \rightarrow \text{Min} \geqslant E_G \leftarrow \text{Grund-zustands-energie}$$

lineares Variationsproblem $\Rightarrow$
für eine orthonormale Basis $\{|n\rangle\}$
ergibt sich die Lösung aus dem
Eigenwertproblem

$$\sum_{m=0}^{N} \langle n|\hat{H}|m\rangle c_m^{(N)} = E_N c_n^{(N)}$$

$\uparrow$ bestmöglichster, d.h. niedrigster, Energiewert für gegebene Basis-größe N wird durch den niedrigsten Eigenwert gegeben

Da eine Basis der Größe $N+\Delta N$, $\Delta N > 0$, die Basis der Größe N enthält, gilt

$$E_N \geqslant E_{N+1} \geqslant E_{N+2} \geqslant \ldots \geqslant E_G$$

Aufgrund der Vollständigkeit der Basis gilt somit

$$\lim_{N \to \infty} E_N = E_G .$$

Analoges Verhalten wie für die Grundzustandsenergie ergibt sich auch für die Energien der angeregten Zustände, d.h. diese fallen mit zunehmenden N monton.